



TITLE:

スラブ中に束縛されている電子が
作る素励起(簡単な微視的理論)

AUTHOR(S):

市川, 昌和

CITATION:

市川, 昌和. スラブ中に束縛されている電子が作る素励起(簡単な微視的理論). 物性研究 1971, 16(6): 769-779

ISSUE DATE:

1971-09-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88356>

RIGHT:

スラブ中に束縛されている電子が 作る素励起（簡単な微視的理論）

早大・理工応物 市川 昌和

（8月2日受理）

§ 0. 要 約

スラブ中に束縛された電子間の相関を繰り入れた有効ポテンシャルを，R. P. 近似かつ高周波数近似によって計算した。それは体積的な効果と表面的な効果を含む二つの部分から成り立ち，それらの部分のボールからバルク・プラズマと表面プラズマの励起エネルギーが得られた。有効ポテンシャルと密度相関関数の間の関係式より，入射波及び散乱波が一般にひずんでいる場合における電子線の散乱確率が求められた。特に両波を平面波と仮定した場合，その結果は Ritchie が半古典的に与えた結果と一致した。

§ 1. 序 論

スラブによって束縛されている電子ガスに関する理論は，半古典的には Ritchie⁽¹⁾，Ferrell 及び Stern⁽²⁾ 等によって考えられ，量子論的には最近 Fedders⁽³⁾，及び Feibelman⁽⁴⁾ 等によって考えられた。Fedders は，無限バリエーで束縛されている電子の波動関数を用いることによって，境界の影響を取り入れた。しかし実際に波動関数を用いる為に，その計算は非常に複雑なものとなっている。Feibelman は密度行列の方法を用い，自由電子（ただし境界によって束縛されている）による密度が表面で段階関数的に変化すると仮定することによって，表面プラズマについての簡単化した議論を行なった。

ここではグリーン関数の方法を用いて，スラブに束縛されている電子ガス中の集団運動についての量子論的な議論を行なった。この取り扱いには，Fedders の取り扱いよりはるかに簡単化されており，又ある特別の場合 Feibelman の結果に一致する。

以下では，まず有効ポテンシャルを R. P. 近似及び高周波数近似で計算し，素励起の励起エネルギーを求める。次に有効ポテンシャルと密度相関関数の間

の関係より，入射電子線の散乱確率を求める。

§ 2. 有効ポテンシャル

いまモデルとして z 方向において $0 \leq z \leq d$ の範囲に規定され， $x-y$ 方向には無限であるような slab 中に束縛され，クーロン力で相互作用している電子ガスを考える。

その系における有効ポテンシャル（電子間相互作用を含んだクーロンポテンシャル）は，時間及び $(x-y)$ 方向では系が一様であることを考えれば，次のように書ける（ただし $\hbar = 1$ の単位系を以下では考える）

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) &= v(\mathbf{k}, z_1 - z_2) \\ &+ \int dz_3 dz_4 v(\mathbf{k}, z_1 - z_3) P_0(\mathbf{k}, \omega, z_3, z_4) V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_4, z_2) \\ P_0(\mathbf{k}, \omega, z_3, z_4) &= \frac{-2i}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}' d\omega' G_0(\mathbf{k} + \mathbf{k}', \omega + \omega', z_3, z_4) \\ &\quad \times G_0(\mathbf{k}', \omega', z_4, z_3) \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで $v(\mathbf{k}, z)$ はクーロンポテンシャルの $x-y$ 方向に関するフーリエ成分， $\frac{2\pi e^2}{k} e^{-k|z|}$ である。そして自由粒子グリーン $G_0(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2)$ は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) &= \sum_n \frac{\varphi_n(z_1) \varphi_n^*(z_2)}{\omega - (\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + E_n) + i\epsilon} \theta(|E_n + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}| - E_{k_0}) \\ &+ \sum_n \frac{\varphi_n(z_1) \varphi_n^*(z_2)}{\omega - (\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + E_n) - i\epsilon} \theta(E_{k_0} - |E_n + \frac{\mathbf{k}^2}{2m}|) \end{aligned} \quad (2.2)$$

ここで E_{k_0} はフェルミエネルギー， $\theta(t)$ は階段関数， $\varphi_n(z)$ は電子をスラブ内に束縛するのに必要なポテンシャルを $U(z)$ とすれば，下記の Schrödinger 方程式を満す波動関数である。

$$\left(-\frac{1}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U(z)\right) \varphi_n(z) = E_n \varphi_n(z) \quad (2.3)$$

ただし E_n は z 方向に関する電子のエネルギーである。

(2.2) 式を (2.1) 式に代入し ω に関して積分すると $P_0(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2)$ としては

$$\begin{aligned} P_0(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) = & \frac{2}{(2\pi)^2} \sum_{nn'} \int d\mathbf{k}_1 \varphi_n^*(z_1) \varphi_{n'}(z_1) \varphi_{n'}^*(z_2) \varphi_n(z_2) \\ & \times \left[\frac{\theta(E_k - |\frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n|) \theta(|\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} + E_{n'}| - E_{k_0})}{\omega + \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} - E_{n'} + i\epsilon} \right. \\ & \left. - \frac{\theta(|\frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n| - E_{k_0}) \theta(E_{k_0} - |\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} + E_{n'}|)}{\omega + \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n - \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} - E_{n'} - i\epsilon} \right] \end{aligned} \quad (2.4)$$

で与えられ, さらに $|\frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} + E_{n'} - \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} - E_n| / \omega$ に関して2次以上のオーダーの項を無視し, ⁽⁵⁾ 完備性 $\sum_n \varphi_n(z) \varphi_n^*(z') = \delta(z - z')$ 及び, (2.3) 式を用いて E_n を含む項等を変形すれば次のように書き換えることが出来る。

$$\begin{aligned} P_0(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) = & \frac{k^2}{\omega^2 m} \delta(z_1 - z_2) n_0(z_1) \\ & - \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{2m\omega^2 n} \sum \int d\mathbf{k}_1 (\varphi_n^*(z_1) \varphi_n(z_2) + \varphi_n(z_1) \varphi_n^*(z_2)) \\ & \times \theta(E_{k_0} - |\frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n|) \frac{d^2}{dz_2^2} \delta(z_1 - z_2) \\ & + \frac{2}{(2\pi)^2} \frac{1}{2m\omega^2 n} \sum \int d\mathbf{k}_1 \delta(z_1 - z_2) \theta(E_{k_0} - |\frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} + E_n|) \end{aligned}$$

$$\times (\varphi_n^*(z_1) \frac{d^2 \varphi_n(z_2)}{dz_2^2} + \varphi_n(z_1) \frac{d^2 \varphi_n^*(z_2)}{dz_2^2}) \quad (2.4')$$

ここで $n_0(z)$ は $n_0(z) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k} \sum_n \varphi_n^*(z_1) \varphi_n(z_1) \theta(E_{k_0} - |\frac{\mathbf{k}^2}{2m} + E_n|)$

であり、自由電子（相互作用をしていない電子）の密度を表わす。

(2.4') 式を (2.1) 式に代入し、部分積分を実行すれば、高周波数近似において V_{eff} は次式で与えられる。

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) &= \frac{2\pi e^2}{k} e^{-k|z_1 - z_2|} \\ &+ \frac{2\pi k e^2}{m\omega^2} \int dz_3 e^{-k|z_1 - z_3|} n_0(z_3) V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_3, z_2) \\ &- \frac{2\pi e^2}{mk\omega^2} \int dz_3 e^{-k|z_1 - z_3|} \left\{ \frac{dn_0(z_3)}{dz_3} \cdot \frac{dV_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_3, z_2)}{dz_3} \right. \\ &\quad \left. + n_0(z_3) \frac{d^2 V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_3, z_2)}{dz_3^2} \right\} \quad (2.5) \end{aligned}$$

ここで Feibelman⁽⁴⁾ が仮定したように、スラブ内において自由電子密度 $n_0(z)$ は一定、スラブ外では零と仮定する。つまり $n_0(z) = n_0(\theta(z) - \theta(z-d))$ であるとする。そのような仮定のもとでは、(2.5) 式は、 z_1 の範囲； $z_1 < 0$ ， $0 \leq z_1 \leq d$ ， $d < z_1$ に対してそれぞれ単なる代数方程式となる。ここでは、 $V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2)$ が満す方程式を以後重要となる $0 \leq z_1 \leq d$ の範囲についてのみ書くと、

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) &+ \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} e^{k(z_1 - d)} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, d, z_2) \\ &+ \frac{\omega_p^2}{2\omega} e^{-kz_1} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, 0, z_2) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) \end{aligned}$$

スラブ中に束縛されている電子が作る素励起（簡単な微視的理論）

$$= \frac{2\pi e^2}{k} e^{-k|z_1 - z_2|} \quad (2.6)$$

となる。ここで ω_p はプラズマの励起エネルギーを表わす。

(2.6) 式において, z_1 をそれぞれ 0, d と置くことにより $V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, 0, z_2)$, $V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, d, z_2)$ が求められ, それらの解を再び (2.6) 式に代入すれば $V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2)$ が求められる。その結果は, $0 \leq z_1 \leq d$ において

$$\begin{aligned} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) = & \frac{2\pi e^2}{k} \frac{e^{-k|z_1 - z_2|}}{1 - \omega^2/\omega_p^2} \\ & - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} \frac{2\pi e^2 (1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}) \{ e^{-kz_1} e^{-k|z_2|} + e^{k(z_1 - d)} e^{-k|z_2 - d|} \}}{(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}) \{ (1 - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2})^2 - (\frac{\omega_p^2}{2\omega^2})^2 e^{-2kd} \}} \\ & + (\frac{\omega_p^2}{2\omega^2})^2 \frac{2\pi e^2}{k} \frac{e^{-kd} \{ e^{-kz_1} e^{-k|z_2 - d|} + e^{k(z_1 - d)} e^{-k|z_2|} \}}{(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}) \{ (1 - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2})^2 - (\frac{\omega_p^2}{2\omega^2})^2 e^{-2kd} \}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

となる。

(2.7) 式の右辺の第1項は, 境界が存在しない場合に計算される有効ポテンシャルで, その極はバルクプラズマの励起エネルギー (ω_p) を与える。第2項, 第3項は共に境界が存在することから生じる項であり, その z 依存性からそれぞれ表面に局在している素励起による付加ポテンシャルを表わしていることが分かる。特に第3項は両表面間の相互干渉により出てくる付加ポテンシャルで, 明らかに十分厚いとき ($kd \gg 1$), 零となる。これらの項は $\omega =$

$\frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm e^{-kd}}$ なる励起エネルギー及びバルクプラズマの励起エネルギーを与えている。 $\omega = \frac{\omega_p}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm e^{-kd}}$ なる励起エネルギーは, Ritchie が半古典的に与えたもの⁽¹⁾に一致し, 十分厚いときに $\frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$ の表面プラズマの励起エネルギー

となる。これらの項がバルクプラズマの励起エネルギーを与えていることは、体積的な現象と表面的な現象が厳密には分離出来ないことを示している。又、この有効ポテンシャルは、 $z_2 = 0$ と置き、 $kd \gg 1$ の近似をとれば、Feibelman⁽⁴⁾ が定義した fluctuation ポテンシャルと一致することが分かる。

§ 3. 散乱確率

入射電子線がスラブ中に束縛されている電子ガスによって散乱される系を考える。入射電子の全散乱確率は、第1ボルン近似では、

$$\sigma = \frac{2\pi L}{v} \sum_f | \langle f | H' | i \rangle |^2 \delta(E_f - E_i) \quad (3.1)$$

となる。ここで $|i\rangle$, $|f\rangle$ はそれぞれ全系の始状態及び終状態を、 E_i , E_f はそれらの全エネルギーを表わす。又 L は z 方向に関する規格化の長さ、 v は入射電子の速度を表わす。

クーロン相互作用ハミルトニアン H' を第2量子化表示し、良く知られている方法⁽⁶⁾を用いて、変形すれば σ として

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{-2(4\pi e^2)^2}{v \cdot L \cdot A} \text{Im} \sum_{f_e} \sum_{\mathbf{q}_\perp} \sum_{\mathbf{q}'_\perp} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{(q_\perp^2 + k^2)(q'^2_\perp + k^2)} \right. \\ & \times \int d\mathbf{r}_1 \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) e^{i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} \varphi_f(\mathbf{r}_1) \\ & \times \int d\mathbf{r}_2 \varphi_i(\mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{q}'_\perp - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_2} \varphi_f(\mathbf{r}_2) \\ & \left. \times \int dz \int dz' e^{-i\mathbf{q}_\perp \cdot \mathbf{z}} e^{-i\mathbf{q}'_\perp \cdot \mathbf{z}'} P(\mathbf{k}, \omega, z, z') \right] \quad (3.2) \end{aligned}$$

を得る。ここで入射電子のエネルギー及び散乱電子のエネルギーをそれぞれ $\frac{\mathbf{k}^2}{2m}$, $\frac{\mathbf{k}'^2}{2m}$ とすれば、 ω は $\omega = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \frac{\mathbf{k}'^2}{2m} + i\epsilon$ で与えられる。又 $\varphi_i(\mathbf{r})$, $\varphi_f(\mathbf{r})$ はそれぞれ電子の入射波及び散乱波、 \mathbf{q}_\perp は表面に垂直な方向の波数ベクトル、 \mathbf{k} はそれに平行な波数ベクトル、 f_e は散乱波の終状態に関する和、

スラブ中に束縛されている電子が作る素励起（簡単な微視的理論）

A は $(x-y)$ 平面における規格化の面積，そして Im は虚数部を取ることをそれぞれ表わす。

$P(\mathbf{k}, \omega, z, z')$ は基底状態における 2 体グリーン関数 $P(1, 1') = -i \langle T(\hat{n}(\mathbf{x}, t) \hat{n}(\mathbf{x}', 0)) \rangle$ を時間と $(x-y)$ 方向に関してフーリエ変換したものである。ただし $\hat{n}(\mathbf{x}, t)$ はハイゼンベルグ表示における密度オペレーターである。

R.P. 近似において，この 2 体グリーン関数は有効ポテンシャルに結び付けられる（付録参照）。

(A.6) 式を (3.2) 式に代入し， V_{eff} として (2.7) 式の $kd \gg 1$ とした結果を用いれば（ $kd \gg 1$ とする理由は討論において考察する。）， σ は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{-8\pi e^2 \omega_p^2}{v \cdot L \cdot A} \text{Im} \sum_{\mathbf{f}_e} \sum_{\mathbf{q}_\perp} \sum_{\mathbf{q}'_\perp} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{1}{k^2 + \mathbf{q}_\perp^2} \cdot \frac{1}{k^2 + \mathbf{q}'_\perp^2} \right. \\ & \times \int d\mathbf{r}_1 \varphi_i^*(\mathbf{r}_1) e^{i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_1} \varphi_f(\mathbf{r}_1) \\ & \times \int d\mathbf{r}_2 \varphi_i(\mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{q}'_\perp - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_2} \varphi_f^*(\mathbf{r}_2) \left\{ \frac{k^2 - \mathbf{q}'_\perp \cdot \mathbf{q}_\perp}{\omega^2 - \omega_p^2} \int_0^d e^{-i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}'_\perp) \cdot \mathbf{z}} dz \right. \\ & \left. \left. - \frac{k}{\omega^2 - \omega_p^2} (1 + e^{-i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}'_\perp) \cdot d}) - \frac{k}{\omega^2 - \frac{\omega_p^2}{2}} (1 + e^{-i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}'_\perp) \cdot d}) \right\} \right] \quad (3.3) \end{aligned}$$

(3.3) 式は入射波及び散乱波が他の相互作用によってひずんでいる場合の一般式である。

上式の第 2 項と第 3 項の $e^{-i(\mathbf{q}_\perp + \mathbf{q}'_\perp) \cdot d}$ は電子が入射する表面と反対の表面付近に存在する素励起による散乱確率を示している。

いま入射波及び散乱波をそれぞれ平面波と考えれば，散乱確率として

$$\sigma = \frac{e^2 \omega_p^2}{v 2\pi^2} \int d^2 \mathbf{K}' \left[\frac{d}{(\mathbf{K}_\parallel - \mathbf{K}'_\parallel)^2 + (\mathbf{K}_\perp - \mathbf{K}'_\perp)^2} \delta\left(\frac{\mathbf{K}^2}{2m} - \frac{\mathbf{K}'^2}{2m} - \omega_p\right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{2|K_{\parallel} - K'_{\parallel}|}{\{(K_{\parallel} - K'_{\parallel})^2 + (K_{\perp} - K'_{\perp})^2\}^2} \delta\left(\frac{K^2}{2m} - \frac{K'^2}{2m} - \omega_p\right) \\
& + \frac{2\sqrt{2}|K_{\parallel} - K'_{\parallel}|}{\{(K_{\parallel} - K'_{\parallel})^2 + (K_{\perp} - K'_{\perp})^2\}^2} \delta\left(\frac{K^2}{2m} - \frac{K'^2}{2m} - \frac{\omega_p}{\sqrt{2}}\right) \quad (3.4)
\end{aligned}$$

が得られる。

ここで K_{\parallel}, K_{\perp} は、それぞれ波数ベクトルの表面に平行及び垂直な成分を表わす。

(3.4) 式の結果は Ritchie の結果⁽¹⁾ (2.4 式) と一致する。第 1 項はバルクプラズマによる散乱確率を表わし、それは厚さに比例する。第 2 項、第 3 項は境界の影響から生ずる項で、特に第 3 項目は $\frac{\omega_p}{\sqrt{2}}$ の励起エネルギーを持つ表面プラズマの励起による散乱確率を表わしている。

§ 4. 討 論

結果を導くに当り、高周波数近似； $\omega \gg \left| \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} + E_{n'} - \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} - E_n \right|$ 及び自由電子密度が階段関数的に変化するという 2 つの仮定を用いた。そのような仮定がどのような場合に許されるか簡単に考察してみよう。

(2.4) 式において、我々は前者の近似を用いた。しかし (2.4) 式で分かるように n, n' は独立であり、 $E_{n'} - E_n$ は任意の値を取ることが出来るので、単に高周波数近似が正しいとすることは出来ない。

系が三次元的な空間移動不変の性質を持つ場合、すなわち $\varphi_n(z)$ が平面波と考えられる場合、 $E_n - E_{n'}$ の範囲が自動的に規定されることを知っている。⁽⁵⁾ そこで n についての和を取る以前に $\omega \gg \left| \frac{(\mathbf{k} + \mathbf{k}_1)^2}{2m} + E_{n'} - \frac{\mathbf{k}_1^2}{2m} - E_n \right|$ と仮定するのが許されるのは、スラブが十分厚く、電子状態がスラブ内では平面波として近似して良いような場合であると考えられる。スラブが薄くなるにつれ、束縛されている電子は定在波としての性質が顕著になり、又エネルギー差； $E_n - E_{n'}$ もそれに従って大きくなる。それ故、高周波数近似はスラブが薄くなるに従って悪くなると考えられる。又自由電子密度をスラブ内では一定、外では零としたが、それもスラブが十分厚い場合に許される仮定であり、自由電

子密度の振動的な振る舞い, 及び境界での連続的な変化が重要となる薄い場合には, 不適当な仮定となると考えられる。

上記2つの理由から, 我々の結果は, スラブが十分厚い場合, つまり $kd \gg 1$ の場合に正しいと考えられるのである。

§ 4. 結 論

我々はグリーン関数の方法を用いることによって, スラブ内に束縛されている電子が作る素励起, 及びそれによる入射電子の散乱確率についての議論を行なった。その結果は, ここで用いた近似の範囲では, Ritchie が半古典的に導出した結果と一致した。

彼の結果は, あくまでも入射電子, 及び散乱電子が平面波の場合に限られるが, 我々の結果 (3.3) 式はそれらの波が他の場との相互作用によって歪んでいる場合にも用いることが出来る。ただその場合注意すべきなのは, 入射波としても外向波, 散乱波としては内向波を用いなくてはならないということである (Distorted Born 近似)。

いま簡単な考察として, 入射電子が結晶場との強い相互作用によって, ごく表面から反射される場合 (低速電子線) を考えてみる。その場合, 不確定性関係より (3.3) 式における q_{\perp}, q'_{\perp} はある広がりを持つようになる。その結果, 非常に大ざっぱな計算ではあるが, (3.3) 式中の $e^{-iq_{\perp}d}$ なる項から q_{\perp} が決まらなと仮定して q_{\perp} について積分を行なうと, e^{-kd} に比例する項が生ずる。これは厚い場合 ($kd \gg 1$) のとき零となる。つまり電子が入射して来る表面と反対方向の表面に存在する素励起による散乱確率への寄与はなくなること, 及びバルクプラズマによる散乱確率も d に比例せず小さくなることから, この大ざっぱで簡単な考察から示される。

(3.3) 式中の φ_i, φ_f として, 低速電子線で用いられている結晶場との多重散乱を考慮した波動関数⁽⁷⁾を用いることにより, バルクプラズマ及び表面プラズマによる散乱確率の大小がどのようになるか, 又それらの励起による回折パターンがどのようになるかについての考察は目下進行中である。

市川昌和

結び

指導教授の大槻先生及び同研究室の川村君に、いろいろ討論をして下さったことに対して感謝の意を表します。

付 録

2体グリーン関数 P は, uniform positive back ground を仮定した場合, R. P. 近似において

$$P(1,2) = P_0(1,2) + \int d3 d4 P(1,3) V(3-4) P_0(4,2) \quad (\text{A.1})$$

で与えられる。ここで $V(3-4) \equiv v(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_4) \delta(t_1 - t_2)$ 。

(A.1) 式をマトリックスとして考えると, P は形式的に次のように書ける。

$$P = P_0 (1 - V P_0)^{-1} \quad (\text{A.2})$$

ただし $(1 - V P_0)^{-1}$ は $(1 - V P_0)$ の逆マトリックスである。

同様に (2.1) 式をマトリックスに関する方程式 と考えると次のように変形出来る。

$$(1 - V P_0)^{-1} = - V_{\text{eff}} V^{-1} \quad (\text{A.3})$$

ただし V^{-1} は $V V^{-1} = -1$ で定義されるマトリックスである。(A.3) 式に (A.2) 式に代入し, 積分表示に直せば P は

$$P(1,2) = - \int P_0(1,3) V_{\text{eff}}(3,4) V^{-1}(4,2) d3 d4 \quad (\text{A.4})$$

ただし $V^{-1}(1,2)$ は $V(1,2) = \delta(t_1 - t_2) \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ が $\nabla_1^2 V(1,1') = -4\pi e^2 \delta(1-1')$ を満すことより,

$$V^{-1}(1,2) = \frac{1}{4\pi e^2} \nabla_1^2 \delta(1-2) \quad (\text{A.5})$$

である。

(A.5) 式を (A.4) 式に代入し, 表面に平行な方向と時間に関してフー

スラブ中に束縛されている電子が作る素励起 (簡単な微視的理論)

リエ変換し, そして高周波数近似を取れば

$$P(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) = \frac{1}{4\pi e^2 m \omega^2} \left(k^2 - \frac{d^2}{dz_2^2} \right) \{ k^2 n_0(z_1) V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) \\ - n_0(z_1) \frac{d^2}{dz_1^2} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) - \frac{dn_0(z_1)}{dz_1} \frac{d}{dz_1} V_{\text{eff}}(\mathbf{k}, \omega, z_1, z_2) \}$$

(A.6)

となる。

参 考

- (1) R.H.Ritchie, Phys. Rev. 106, 874(1957)
- (2) E.A.Stern and R.A.Ferrell, Phys. Rev. 120, 130(1960)
- (3) P.A.Fedders, Phys. Rev. 153, 438(1967)
- (4) P.J.Feibelman, Phys. Rev. 176, 551(1968)
- (5) D.Pines, "Elementary Excitations in Solids", W.A.Benjamin, Inc., New York, 1964.
- (6) A.I.Larkin, Soviet Phys. JETP 37, 264(1960)
- (7) E.G.Mcrae, J.Chem. Phys. 45, 3258(1966)